

УДК 537.525.7+621.762

НЕСТАЦИОНАРНАЯ МОДЕЛЬ ВЧЕ-РАЗРЯДА ПРИ ПОНИЖЕННОМ ДАВЛЕНИИ¹⁾

И.Ш. АБДУЛЛИН¹, В.С. ЖЕЛТУХИН¹, В.Ю. ЧЕБАКОВА², М.Н. ШНЕЙДЕР³

¹ Казанский национальный исследовательский технологический университет,

² Казанский (Приволжский) федеральный университет, ³ Принстонский университет, США

E-mail: vzheltukhin@gmail.com, vchebakova@mail.ru

NON STATIONARY MODEL OF CAPACITIVE COUPLED RF DISCHARGE OF LOW PRESSURE

I.Sh. ABDULLIN¹, V.S. ZHELTUKHIN¹, V.Yu. CHEBAKOVA², M.N. SHNEIDER³

¹ Kazan National Research Technological University, ² Kazan Federal University,

³ Princeton University, USA

Аннотация

В работе представлена нестационарная математическая модель ВЧЕ-разряда в аргоне при пониженных давлениях с учетом влияния метастабильных атомов. Данная модель актуальна как при небольших межэлектродных расстояниях, так и для расстояний порядка 0.2–0.5 м. Для численной реализации математической модели был создан программный комплекс в среде MatLab. В качестве основных параметров пользователем вводятся: межэлектродное расстояние, амплитуда напряжения на генераторе, частота генератора, давление газа, число точек сетки по пространственной и временной осям координат, температура газа на электродах. С помощью программного комплекса рассчитываются распределения концентрации ионов, электронов, метастабильных атомов, атомной и электронной температуры на каждом временном слое, полный ток разряда. Дополнительно пользователь может рассчитать параметры ВЧЕ-разряда, усредненные по периоду колебаний электромагнитного поля. Результаты расчетов могут быть представлены как в графическом, так и в табличном представлении.

Ключевые слова: Высокочастотный емкостный разряд, электронная и ионная концентрация, концентрация метастабильных атомов, электронная температура.

Summary

This paper describes the non-stationary model of RF capacitive discharge in argon at low pressures taking into account the influence of metastable atoms. This model describes discharges with small and large (up to 0.2–0.5 m) inter-electrode distances. For the numerical implementation of the mathematical model the software was designed on MatLab platform. The main parameters entered by the user are: the electrode spacing, the amplitude of the voltage on the generator, the generator frequency, gas pressure, the number of grid points in the spatial and temporal axes, the gas temperature at the electrodes. Spatial distributions of ions, electrons, metastable atoms, atomic and electron temperatures at each time step and the total discharge current can be calculated with software package. Additionally, the user can calculate the parameters of RF capacitive discharge averaged over the period of oscillations of the electromagnetic field. Results can be presented both graphically and in tabular form.

Key words: Radio-frequency capacitive discharge, electron and positive ion density, metastable density, electron temperature.

Введение

Высокочастотный емкостный (ВЧЕ) разряд при давлениях $p=13.3\text{--}133$ Па эффективно применяется для модификации натуральных полимерных материалов, таких, как кожа, ткани, мех [1–5]. В статье [6] нами показано, что существенную роль в определении электронной температуры играют нагрев газа и потери

¹⁾ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты 12-01-00955, 14-01-00755) и Минобрнауки РФ (базовая часть госзадания, проект от 01.02.2014 г. № 2196)

энергии на возбуждение метастабильных атомов. В связи с этим, для определения диапазона устойчивого горения ВЧЕ-разряда пониженного давления в плазмотроне с большим межэлектродным расстоянием разработан программный комплекс, реализованный в среде MatLab. Программы написаны в соответствии с модульным принципом, что позволило осуществить раздельное программирование, отладку и тестирование составных частей пакета программ, а также простую модернизацию и настройку пакета на решение задач различного уровня сложности. Для создания графического интерфейса использовалась специализированная среда GUIDE [7, 8].

Для ряда модельных задач проведены численные эксперименты. Расчеты проводились до выхода процесса на установившийся периодический режим, когда достигался полный баланс заряда в межэлектродном промежутке: заряд, который уносится за период на электрод электронам, и в точности компенсируется выносом положительного заряда ионами. Результаты расчетов, проведенных при разных значениях входящих параметров, показали хорошее качественное совпадение известными результатами [9, 10].

1. Общее описание

Данный программный комплекс реализует численный алгоритм решения задачи расчета основных параметров ВЧЕ-разряда в аргоне между плоско – параллельными электродами, один из которых заземлен, а второй соединен с конденсатором и высокочастотным генератором. Электрод считается идеальным проводником (сопротивление равно нулю), поэтому ток заряженных частиц на поверхности электрода равен току во внешней цепи.

Программный комплекс состоит из трех блоков.

В первом блоке при постоянной электронной и газовой температуре для нахождения более точных начальных приближениях решаются следующие задачи:

1. Краевая задача для уравнения Пуассона для потенциала электрического поля

$$-\frac{\partial^2 \varphi(x, t)}{\partial x^2} = \frac{e}{\varepsilon_0} (n_+(x, t) - n_e(x, t)), \quad 0 < x < l, \quad t > 0,$$

$$\varphi(0, t) = 0; \quad \dot{\varphi}(l, t) = \frac{C_B \dot{\varphi}_g D}{\varepsilon_0 + C_B D} - \left(e \int_0^l (\Gamma_+ - \Gamma_e) dx \right) / (\varepsilon_0 + C_B D).$$

Здесь l – расстояние между электродами, координата $x = 0$ соответствует заземленному электроду, $x = l$ – нагруженному, n_e , n_+ – концентрация электронов и положительно заряженных ионов соответственно, e – заряд электрона, ε_0 – электрическая постоянная, $\varphi_g(t) = V_a \sin(\omega t)$ – напряжение на генераторе, ω – круговая частота электромагнитного поля, V_a – амплитуда колебания напряжения на генераторе, C_B – электрическая емкость генератора, $\Gamma_e(n_e, T_e) = -D_e \partial n_e / \partial x - \mu_e n_e E$ и $\Gamma_+(n_+, T_+) = -D_+ \partial n_+ / \partial x + \mu_+ n_+ E$ – плотности потоков электронов и ионов соответственно, E – напряженность электрического поля;

2. Начально-краевая задача для уравнения конвекции–диффузии для электронного газа:

$$-\frac{\partial n_e(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-D_e \frac{\partial n_e(x, t)}{\partial x} - \mu_e n_e(x, t) E(x, t) \right) =$$

$$= \nu_i n_e - \beta n_e n_+ + R_1 n_m n_e + R_2 n_m^2, \quad 0 < x < l, \quad t > 0,$$

$$\begin{cases} \Gamma_e = -\gamma \Gamma_+, \text{ если } E \leq 0 \text{ при } x = 0 \text{ или если } E < 0 \text{ при } x = l, \\ \frac{\partial \Gamma_e}{\partial x} = 0, \text{ если } E > 0 \text{ при } x = 0 \text{ или если } E \leq 0 \text{ при } x = l, \end{cases}$$

$$n_e(x, 0) = c_0 = \text{const},$$

где постоянная c_0 берется из эксперимента, $\beta(n_e, T_e)$ – эффективный коэффициент рекомбинации (фоторекомбинация + тройная ударно-радиационная), $\nu_i(T_e)$ – частота ионизации [11], γ – коэффициент

вторичный эмиссии, n_m — концентрация метастабилей, R_1, R_2 — коэффициенты процессов ступенчатой $\text{Ar}^* + e \rightarrow \text{Ar}^+ + 2e$ и пеннинговой $\text{Ar}^* + \text{Ar}^* \rightarrow \text{Ar}^+ + \text{Ar}^* + e$ ионизации;

3. Уравнение конвекции–диффузии для ионного газа

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_+(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-D_+ \frac{\partial n_+(x, t)}{\partial x} + \mu_+ n_+(x, t) E(x, t) \right) = \\ = \nu_i n_e - \beta n_e n_+ + R_1 n_m n_e + R_2 n_m^2 \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \\ \begin{cases} \frac{\partial \Gamma_+}{\partial x} = 0, \text{ если } E \leq 0 \text{ при } x = 0 \text{ или если } E < 0 \text{ при } x = l, \\ \Gamma_+ = 0, \text{ если } E > 0 \text{ при } x = 0 \text{ или если } E \leq 0 \text{ при } x = l, \end{cases} \\ n_+(x, 0) = c_1 = \text{const}, \end{aligned}$$

где постоянная c_1 берется из эксперимента

4. Уравнение баланса метастабильных атомов

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_m(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-D_m \frac{\partial n_m(x, t)}{\partial x} \right) = R_3 N n_e(x, t) - R_4 N n_m(x, t) - R_5 N^2 n_m(x, t) - \\ - R_6 n_m(x, t) - R_1 n_m(x, t) n_e(x, t) - R_2 n_m^2(x, t), \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \\ n_m(0, t) = n_m(l, t) = 0, \quad t > 0. \end{aligned}$$

Здесь D_m — коэффициент диффузии метастабильных атомов, $N = P/(k T_+)$ — концентрация атомов в основном состоянии, P — давление, k — постоянная Больцмана, $R_i, i = 3, 4, 5, 6, 7$, — константы процессов возбуждения и тушения метастабильных состояний.

Основные используемые зависимости для коэффициентов представлены в [6, 12] и в первом блоке взяты при значении электронной температуры в 3 эВ и газовой в 300 К. В качестве начальных условий для начально–краевых задач выбирались постоянные значения электронной, ионной и метастабильной концентраций

Для построения консервативной разностной схемы использовался интегро-интерполяционный метод [13]. При этом для численной реализации модели использовалась неявно конечно-разностная схема с равномерным разбиением сетки. Оператор конвективного переноса в дивергентной форме аппроксимировался методом направленных разностей, для линеаризации системы использовался метод сноса нелинейности на предыдущий слой, а так же линеаризацией по методу Ньютона для уравнения конвекции – диффузии для электронного газа.

Во втором блоке программы к этим уравнениям добавляются следующие задачи:

5. Уравнение электронной теплопроводности

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} n_e k T_e \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{5}{2} k T_e \Gamma_e - \lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial x} \right) = n_e (E V_e) - \\ - \frac{3}{2} n_e k (T_e - T_a) \delta \nu_m - I n_e \nu_m - I_1 R_1 n_m n_e - I_2 R_7 n_m n_e, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \\ T_e(0, t) = T_{эл}(0, t), \quad T_e(l, t) = T_{эл}(l, t), \quad t > 0. \end{aligned}$$

Здесь I — потенциал ионизации, I_1 — энергия возбуждения первого уровня, I_2 — энергия перехода из метастабильного в резонансное состояние, V_e — электронная скорость, λ_e — коэффициент электронной теплопроводности, E — напряженность электрического поля, ν_m — эффективная частота столкновений электронов с атомами и ионами в аргоне.

6. Нестационарное уравнение атомной температуры

$$\rho C_p \frac{\partial T_a(x, t)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_a \frac{\partial T_a(x, t)}{\partial x} \right) = j_i + \frac{3}{2} n_e k (T_e - T_a) \delta \nu_c, \quad 0 < x < l, \quad t > 0,$$

$$T_a(0, t) = T_{эл}(0, t), \quad T_a(l, t) = T_{эл}(l, t), \quad t > 0.$$

с температурой на границах, равной температуре электродов.

Здесь j_i — ионный ток, λ_a — коэффициент теплопроводности атомно-ионного газа [14], ρ — массовая плотность газа, C_p — удельная теплоемкость при постоянном давлении [14].

7. Уравнение баланса для нейтральных атомов:

$$\frac{\partial n_n(x, t)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_n \frac{\partial n_n(x, t)}{\partial x} \right) = \beta n_e n_+ - R_3 N n_e + R_4 N n_m - R_5 N^2 n_m, \quad 0 < x < l, \quad t > 0.$$

Здесь D_n — коэффициент самодиффузии нейтральных атомов в собственном газе атомов [14].

В третьем блоке программы происходит обработка полученных результатов, их визуализация и представление в удобном для анализа виде.

2. Результаты расчетов.

Результаты тестовых расчетов ВЧЕ разряда в плазмотроне с межэлектродным расстоянием 0.022 м, при давлении 13.3 Па, амплитуде приложенного напряжения 25 В, показали что концентрация метастабильных атомов достигает максимума $5.3 \cdot 10^{13} [\text{м}^{-3}]$, температура электронов принимает в приэлектродных областях максимальные значения 2.85 эВ, в области квазинейтральной плазмы — минимальное значение 1.89 эВ, при этом температура газа остается практически постоянной 305 К. Концентрация электронов имеет характерную колоколообразную форму с максимумом в центре разряда

Результаты тестовых расчетов ВЧЕ-разряда в плазмотроне с межэлектродным расстоянием 0.0254 м, при давлении 133 Па, амплитуде приложенного напряжения 100 В показали, что концентрация метастабильных атомов достигает $3.155 \cdot 10^{17} [\text{м}^{-3}]$, Температура электронов в области квазинейтральной плазмы принимает значение 2.27 эВ. Концентрация заряженных частиц в амбиполярной области составляет $2.106 \cdot 10^{16} [\text{м}^{-3}]$.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Абдуллин И.Ш., Желтухин В.С., Кашапов Н.Ф.** Высоочастотная плазменно-струйная обработка материалов при пониженных давлениях. Теория и практика применения. — Казань: Изд-во Казанского университета, 2000. — 348 с.
2. **Абдуллин И.Ш., Махоткина Л.Ю.** Высоочастотная плазменная обработка в производстве обуви. Теория и практика использования. — Казань: Из-во КНИТУ, 2006. — 348 с.
3. **Абдуллин И.Ш., Сысоев В.А., Салимова А.И.** Применение низкотемпературной плазмы в технологии бесхромового дубления // Материалы Всероссийской научной конференции по физике низкотемпературной плазмы ФНТП-2004. — Петрозаводск, 2004. — С. 172—174.
4. **Тихонова Н.В., Желтухин В.С., Чебакова В.Ю., Бородаев И.А.** Математическая модель высоочастотной плазменной обработки многослойных материалов заготовки верха обуви // Вестник Казанского технологического университета. — 2012. — Т. 15, № 17. — С. 36—39.
5. **Абдуллин И.Ш., Желтухин В.С., Чебакова В.Ю.** Высоочастотный емкостной разряд: моделирование (обзор) // Вестник Казанского технологического университета. — 2014. — Т. 17, № 23. — С. 9—14.
6. **Абдуллин И.Ш., Желтухин В.С., Чебакова В.Ю., Шнейдер М.Н.** Моделирование высоочастотного емкостного разряда при больших межэлектродных расстояниях. I. Постановка задачи // Ученые записки Казанского университета. Серия физико-математические науки. — 2013. — Т. 155, Кн. 2 — С. 123—130.
7. **Бадриев И.Б., Бандеров В.В., Задворнов О.А.** Разработка графического пользовательского интерфейса в среде MatLab. — Казань: Изд-во Казанского федерального университета, 2011. — 112 с.
8. **Бандеров В.В.** Создание пользовательского интерфейса при разработке программных комплексов в среде MATLAB // Сеточные методы для краевых задач и приложения. Материалы Девятой Всероссийской конференции. — Казань: Отечество, 2012. — С. 48—49.

9. **Dimitris P. Lymberopoulos and Demetre J. Economou.** Fluid simulations of glow discharges: Effect of metastable atoms in argon // J. Appl. Phys. — 1993. — V. 73, № 8 (15 April 1993). — P. 3668–3679.
10. **Лисовский В.А.** Особенности $\alpha - \beta$ -перехода в ВЧ-разряде низкого давления в аргоне // Журнал технической физики. — 1998. — Т. 68, Вып. 5. — С. 52–60.
11. **Райзер Ю.П., Шнейдер М.Н.** Продольная структура катодных частей тлеющего разряда // Теплофизика высоких температур. — 1991. — Т. 29, Вып. 6. — С. 1041–1052.
12. **Абдуллин И.Ш., Желтухин В.С., Чебакова В.Ю., Шнейдер М.Н.** Математическая модель ВЧЕ-разряда в аргоне при больших межэлектродных расстояниях // Вестник Казанского технологического университета. — 2013. — Т. 16, № 22. — С. 334–338.
13. **Самарский А.А., Вабищевич П.Н.** Численные методы решения задач конвекции–диффузии. — М.: Эдиториал УРСС, 1999. — 248 с.
14. **Фастовский В.Г., Ровинский А.Е., Петровский Ю.В.** Инертные газы. — М.: Атомиздат, 1972. — 352 с.

REFERENCES

1. **Abdullin I.Sh., Zheltukhin V.S., Kashapov N.F.** High-frequency plasma-blasting treatment of materials at low pressures. Theory and practice of Application [Vysokochastotnaya plazmenno-struynaya obrabotka materialov pri ponizhennykh davleniyakh. Teoriya i praktika primeneniya]. — Kazan: Kazan University, 2000. — 348 p. (in Russian)
2. **Abdullin I.Sh., Makhotkina L.Yu.** High-frequency plasma treatment in the production of shoes. Theory and practice of use [Vysokochastotnaya plazmennaya obrabotka v proizvodstve obuvi. Teoriya i praktika ispol'zovaniya]. — Kazan: Kazan State Technological University, 2006. (in Russian)
3. **Abdullin I.Sh., Sysoev V.A., Salimova A.I.** Application of low temperature plasma in the technology without chrome tanning [Primenenie nizkotemperaturnoi plazmy v tekhnologii beskhromobogo dubleniya] // Proceedings of Russian scientific conference on the Physics of low-temperature plasma. — Petrozavodsk, 2004. — P. 172–174. (in Russian)
4. **Tikhonova N.V., Zheltukhin V.S., Chebakova V.Yu., Borodaev I.A.** Mathematical model of high-frequency plasma processing of multilayer materials uppers [Matematicheskaya model vysokochastotnoi plazmennoi obrabotki mnogosloynnykh materialov zagotovki verkha obuvi] // Bulletin of Kazan State Technological University. — 2012. — V. 15, № 17. — P. 36–39. (in Russian)
5. **Abdullin I.Sh., Zheltukhin V.S., Chebakova V.Yu.** High-Frequency Capacitive Discharge: Simulation (Review) [Vysokochastotnyi emkostnyi razrjad: modelirovanie (obzor)] // Bulletin of Kazan State Technological University. — 2014. — V. 17, № 23. — P. 9–14. (in Russian).
6. **Abdullin I.Sh., Zheltukhin V.S., Chebakova V.Yu., Shneider M.N.** Modeling of a High-Frequency Capacitive Discharge with a Large Inter-Electrode Distance. I. Statement of the Problem [Modelirovanie vysokochastotnogo emkostnogo razrjada pri bol'shikh mezelektroodnykh rasstoyaniyakh. I. Postanovka zadachi] // Uchenyy Zapiski Kazanskogo Universiteta. Ser. Fiz.-Mat. Nauki. — 2013. — V. 155, № 2. — P. 123–130. (in Russian)
7. **Badriev I.B., Banderov V.V., Zadvornov O.A.** Development of a graphical user interface in the environment MatLab [Razrabotka graficheskogo pol'zovatel'skogo interfeisa v srede MatLab]. — Kazan: Kazan University, 2011. (in Russian)
8. **Banderov V.V.** Designing a user interface in the development of software systems in MATLAB [Sozdanie pol'zovatel'skogo interfeisa pri razrabotke programmnykh kompleksov v srede MATLAB] // Mesh methods for boundary-value problems and applications. Proceedings of 9th Russian Conference. — Kazan: Otechestvo, 2014. (in Russian)

9. **Dimitris P. Lymberopoulos and Demetre J. Economou.** Fluid simulations of glow discharges: Effect of metastable atoms in argon // J. Appl. Phys. — 1993. — V. 73, № 8 (15 April 1993). — P. 3668–3679.
10. **Lisowski V.A.** Features of $\alpha - \beta$ transition in the RF low-pressure discharge in argon [Osobennosti $\alpha - \beta$ -perekhida v VCH-razrjade nizkogo davlenija v argone]// Technical Physics. — 1998. — V. 68, № 5. — C. 52–60.(in Russian)
11. **Raiser Yu.P., Schneider M.N.** Longitudinal structure of the cathode parts of a glow discharge parts [Prodol'naja struktura katodnykh chastei tlejutshego razrjada] // High temperatures. — 1991. — V. 29, Is. 6. — P. 1041–1052. (in Russian)
12. **Abdullin I.Sh., Zheltukhin V.S., Chebakova V.Yu., Shneider M.N.** A mathematical model of the RF capacitive discharge in argon at large interelectrode distances [Matematicheskaja model vysokochastotnogo emkostnogo razrjada v argone pri bol'shikh mezelektrodneykh rasstojanijakh]// Bulletin of Kazan State Technological University. — 2013. — V. 16, № 22. — P. 334–338. (in Russian)
13. **Samarskii A.A., Vabishchevich P.N.** Numerical methods for solving the convection–diffusion problems [Chislennye metody reshenija zadach konvekcii–diffuzii]. — Moscow: Editorial URSS, 1999. (in Russian)
14. **Fastovskiy V.G., Rovinskii A.E., Petrovsky Y.** Inert gases [Inertnye gazy]. — Moscow: Atomizdat, 1972. (in Russian)